

тропроводности $\text{HoBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ при уменьшении Po_2 связано с тем, что доминирующим носителем заряда являются «дырки» локализованные на ионах Co, тогда как отрицательное значение коэффициента Зеебека для $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ может быть объяснено тем, что доминирующим носителем заряда в иттрий-содержащем двойном перовските являются электроны, локализованные на ионах Co. Полученные экспериментальные данные были проанализированы и для данных двойных перовскитов были предложены две модели дефектной структуры.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ОБРАЩЕННОСТИ ШПИНЕЛИ ИЗ НЕЙТРОНОГРАММ

Сёмкин М.А.^(1,2), Теплых А.Е.⁽²⁾, Носов А.П.^(1,2), Пирогов А.Н.^(1,2)

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт физики металлов УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 18

Рассмотрим проблему уточнения кристаллической структуры и нахождения распределения $3d$ -ионов шпинели $(\text{Fe}_1)_{8a}(\text{Ni}_1\text{Fe}_1)_{16d}\text{O}_4$ и $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})_{8a}(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})_{16d}\text{O}_4$ по тетра- и окта- позициям из дифракции нейтронов. Так как амплитуды когерентного рассеяния нейтронов ядрами железа $b_{\text{Fe}} = 0.945 \cdot 10^{-12}$ см и никеля $b_{\text{Ni}} = 1.03 \cdot 10^{-12}$ см близки по величине, то определить распределение Ni- и Fe-ионов по кристаллографическим позициям весьма трудно. Поэтому, мы провели расчет нейтронограммы $(\text{Fe}_1)_{8a}(\text{Ni}_1\text{Fe}_1)_{16d}\text{O}_4$ предполагая, что Ni-ионы занимают половину узлов $16d$ с координатами (0.125; 0.125; 0.125), а Fe-ионы находятся в позиции $8a$ с координатами (0.5; 0.5; 0.5) и заполняют вторую половину узлов $16d$ (полностью обращенная шпинель), пространственная группа $Fd-3m$.

Величина амплитуды рассеяния нейтронов ионами кобальта примерно в четыре раза меньше $b_{\text{Co}} = 0.249 \cdot 10^{-12}$ см, чем ионами железа. Благодаря этому, нам удалось обнаружить изменение интенсивности рефлекса (400) (угол $2\theta \approx 51.1^\circ$) на нейтронограммах $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})_{8a}(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})_{16d}\text{O}_4$ при изменении степени обращенности (δ). Отметим, что профиль и интенсивность остальных рефлексов сохраняется. При расчете мы принимали во внимание как величину фактора сходимости (χ^2), так и визуальное различие между экспериментальным и рассчитанным рефлексами (400).

На рис. 1 показаны экспериментальный и расчетный профили рефлекса (400) для шпинели $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})\text{O}_4$, а на рис. 2 приведена

зависимость фактора сходимости от величины δ . Поэтому, варьируя величину δ , можно найти ее значение, при котором достигается наилучшее согласие между экспериментальными и расчетными данными.

Степень обращенности шпинели варьировалась в диапазоне от 0.15 до 0.30 с шагом 0.01, наилучшее согласие между экспериментальной и расчетной нейтронограммами $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})_{8a}(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})_{16d}\text{O}_4$ получается при степени обращенности шпинели равной $\delta = 0.21$.

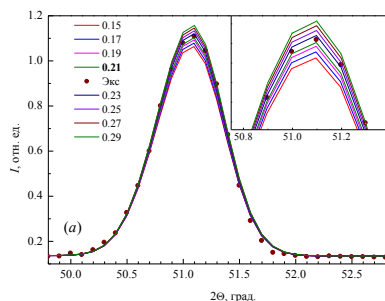


Рис. 1. Рефлекс (400) экспериментальной (точки) и расчетных (линии) нейтронограммы $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})\text{O}_4$

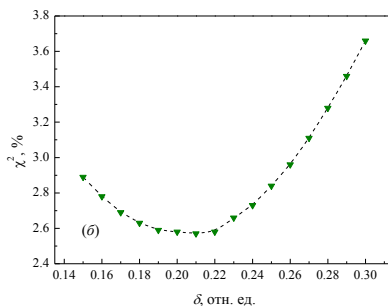


Рис. 2. Зависимость фактора сходимости от величины δ

Итак, благодаря большому различию в амплитудах когерентного рассеяния нейтронов Co- и Fe- ядрами удается определить степень обращенности шпинели $(\text{Co}_\delta\text{Fe}_{1-\delta})_{8a}(\text{Co}_{1-\delta}\text{Fe}_{1+\delta})_{16d}\text{O}_4$ весьма точно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт с УрФУ № 3.6121.2017) и программы «Поток» № 01201463334.

РАСТВОРИМОСТЬ В СИСТЕМАХ

CuAn – NaHCOO – H₂O ПРИ 25°C

Субботина Ю.Р., Елохов А.М.

Пермский государственный национальный

исследовательский университет

614990, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15

Формиаты переходных и редкоземельных металлов, в том числе формиат меди (II), используются в качестве исходных компонентов для производства высокотемпературных сверхпроводников, наноразмерных оксидов, катализаторов гидрирования и окисления органических ве-